

ABSTRAK

Intan Fitriani Azzahra, 2022. Studi *In Sillico* Potensi Antivirus SARS-CoV-2 Pada Senyawa Bioaktif Cengkih (*Syzygium aromaticum* L.) Sebagai Bahan Edukasi Masyarakat Dalam Bentuk Infografis dibawah bimbingan **Dr. Sundari, S.Pd.,M.Pd** dan **Dr. Dharmawaty M. Taher, S.Pd.,M.Si**.

Senyawa bioaktif pada cengkih (*Syzygium aromaticum* L.) diduga memiliki potensi sebagai antivirus SARS-CoV-2 antara lain *rhamnetin*, *biflorin*, β -*caryophyllene*, *eugenil acetat*. Adanya potensi senyawa tersebut dapat dijadikan sebagai bahan informasi dan edukasi kepada masyarakat dalam bentuk infografis. Pada penelitian ini senyawa cengkih diuji aktivitasnya dalam menghambat reseptor SARS-CoV-2 (6LU7). Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui senyawa bioaktif pada cengkih berpotensi sebagai antivirus SARS-CoV-2 dan bagaimana hasil validasi infografis edukasi masyarakat berbasis kajian *in sillico*. Untuk mengetahui potensi senyawa cengkih sebagai antivirus SARSCoV-2 dilakukan penelitian secara *in silico* meliputi prediksi sifat fisikokimia dan *molecular docking*. Prediksi sifat fisikokimia mengacu pada Hukum Lima Lipinski pada situs SwissADME. *Molecular docking* dilakukan menggunakan Autodock Vina. Hasil studi *in sillico* menunjukkan bahwa senyawa *rhamnetin*, *biflorin*, β -*caryophyllene*, *eugenil acetat* berdasarkan prediksi fisikokimia memenuhi kriteria untuk dijadikan sebagai senyawa obat dan berpotensi untuk menghambat SARS-CoV-2 berdasarkan nilai afinitas (*binding affinity*) pada *molecular docking*. Hasil validasi media infografis dengan nilai rerata presentase sebesar 78,81% dikategorikan valid dan layak untuk digunakan sebagai bahan edukasi masyarakat berbasis *in sillico*.

Kata kunci : *in sillico*, senyawa cengkih, *molecular docking*, media infografis

ABSTARCT

Intan Fitriani Azzahra. 2022. In Sillico Study of SARS-CoV-2 Antiviral Potential in Clove Bioactive Compounds (*Syzygium aromaticum* L.) as Public Education Materials in Infographic Form. Advisor (I) **Dr. Sundari , S.Pd.,M.Pd.** Advisor (II) **Dr. Dharmawaty M. Taher, S.Pd.,M.Si**

Bioactive compounds of clove (*Syzygium aromaticum* L.) are thought to be possible as antiviral agents for SARS-CoV-2. The potential of these compounds can be used as material education to the public in the form of infographics. In the study, the clove compounds were tested for their activity at the SARS-CoV-2 (6LU7). This study aims to determine the bioactive compounds in cloves that have the potential as an antiviral and how the results of the validation of infographics for public education based on in silico studies. To determine the potential of clove compounds as antiviral, in silico study was carried out including prediction of physicochemical properties and molecular docking. Prediction of physicochemical properties refers to Lipinski's Five Laws on the SwissADME website and molecular docking is done using Autodock Vina. The results of the in silico study showed that the compounds rhamnetin, biflorin, B-caryophyllene, eugenyl acetate based on physicochemical predictions pass the criteria to be used as medicinal compounds and had the potential as inhibit SARS-CoV-2 based on the binding affinity for molecular docking. The results of infographic validation with a percentage value of 78.81% which categorized as valid and feasible to be used as in silico-based public education materials.

Keywords: in silico, clove compounds, molecular docking, infographic media